

УСЛОВИЯ ДЛЯ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ХИМИЧЕСКОГО РЕАКТОРА

Ряпосов А.В.^{1*}, Хомяков А.П.²

¹⁾ Свердловский научно-исследовательский институт химического машиностроения, г. Екатеринбург, Россия

²⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: ryantony@mail.ru

INITIAL CONDITIONS FOR MATHEMATICAL MODEL OF CHEMICAL REACTOR

Ryaposov A.V.^{1*}, Khomjakov A.P.²

¹⁾ SverdNIChimmash, Yekaterinburg, Russia

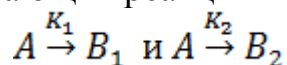
²⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Autocatalytic high pressure chemical was investigated in this study. The important factor of carrying out for successful investigations is to find a method of chemical properties determination and to divide into components difficult types of reactions: parallel and consecutive reactions. It is important to set reliable theoretical initial conditions for experiment carrying out as well as to define the chemical reactor type in accordance with conducting processes. In the theory of defined processes it is necessary to create a mathematical model.

В реакторах смешение конечных и исходных продуктов для большого числа химических реакций нежелательно, и оптимальным является режим идеального вытеснения. В секционных аппаратах обеспечивается локальное перемешивание. Это не распространяется на автокаталитические реакции, в которых целевые продукты являются инициаторами процесса [7].

К автокаталитическому типу относится наш исследуемый химический реактор высокого давления.

Для двух параллельно протекающих реакций типа



где A – исходное вещество, превращающееся в основной (целевой) продукт B_1 и побочный продукт B_2 , уравнения кинетики имеют вид:

$$\frac{dc_1}{d\tau} = K_1 c^{i1} \quad (1)$$

$$\frac{dc_2}{d\tau} = K_2 c^{i2} \quad (2)$$

Полагая, что общая скорость превращения исходного вещества (концентрация которого в реакционной смеси ко времени τ равна c) является суммой скоростей образования основного (концентрация c_1) и побочного (c_2) продуктов, можно написать:

$$-\frac{dc}{d\tau} = K_1 c^{i1} + K_2 c^{i2} \quad (3)$$

Из уравнений (1) и (3) находим концентрацию целевого продукта в реакционной смеси на выходе из реактора идеального вытеснения

$$c_{1B} = \int_{c_B}^{c_H} \frac{dc}{1 + \frac{K_2}{K_1} c^{i2-i1}}$$

и избирательность процесса

$$U_B = \frac{c_{1B}}{c_H - c_B} = \frac{1}{c_H - c_B} \int_{c_B}^{c_H} \frac{dc}{1 + \frac{K_2}{K_1} c^{i2-i1}} \quad (4)$$

Для реактора полного перемешивания избирательность процесса выразится

$$U_{CM} = \frac{1}{1 + \frac{K_2}{K_1} c^{i2-i1}} \quad (5)$$

Из уравнений (4) и (5) следует, что при одинаковом порядке основной и побочной реакций ($i_1=i_2$) состав продуктов на выходе из реактора не зависит от характера движения потоков и определяется лишь отношением K_2/K_1 . [1].

При решении таких задач, как моделирование процессов, протекающих на катализаторе с изменяющейся во времени активностью, ведение процесса в искусственно создаваемых нестационарных условиях, оптимальный пуск и остановка реактора, исследование устойчивости химических процессов, разработка системы автоматического управления и другие, важно знать динамические свойства разрабатываемого контактного аппарата. Для этого необходимо построить и исследовать математическую модель протекающего в реакторе нестационарного процесса [2].

1. Гильперин Н.И., Пиблак В.Л., Костанян А.Е. Структура потоков и эффективность колонных аппаратов химической промышленности. М., Химия (1977).
2. Матрос Ю. Ш., Кириллов В. А., Слинько М. Г. Моделирование химических процессов и реакторов. Т.3. Новосибирск: изд. ИК АН СССР (1972).